

ОСОБЕННОСТЬ ПРИМЕСНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ В КРЕМНИИ, СВЯЗАННАЯ С МАГНИТНЫМ ВЫРОЖДЕНИЕМ ДОНОРНЫХ СОСТОЯНИЙ В КОНЕЧНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

С.М. Дикман, Д.И. Сидельников

Всесоюзный научно-исследовательский институт источников тока

Поступила в редакцию 15 мая 1991 г.

Теоретически показано, что пересечение уровней энергии $E_i(H)$ мелких донорных состояний различной симметрии, связанное с анизотропией эффективной массы, дает возможность экспериментального наблюдения аномально большой не зависящей от электрического поля примесной поляризации.

1. При направлении поля \vec{H} вдоль одной из главных осей кристалла пересечения уровней (точки магнитного вырождения) возникают в кремнии, как показывает расчет, уже в нижней части спектра. В этих случаях отличен от нуля диагональный матричный элемент дипольного момента и в присутствии электрического поля истинное пересечение трансформируется в антипересечение. Величина зазора между расщепленными уровнями пропорциональна полю \vec{E} . Рассматриваемый эффект в неводородоподобном спектре в некотором смысле еще более случаен, чем "случайное" вырождение и линейный эффект Штарка для атома водорода, поскольку в данном случае он не связан с каким-либо законом сохранения.

Мы приводим результат расчета восьми нижних уровней, причем только для электронов, у которых главная ось эллипсоида эффективной массы ориентирована вдоль магнитного поля. Каждый из уровней, таким образом, двукратно вырожден. Это междолинное вырождение снимается при учете поля центральной ячейки, зависящего от типа примеси, но расщепление, как известно¹⁻³, оказывается существенным только для основного состояния. Эксперимент⁴ регистрирует значительно меньшее расщепление чем, например, расчеты в², что на наш взгляд является следствием неудачного выбора в² пробных волновых функций. Аксиальная симметрия позволяет для рассматриваемых уровней сохранить ту же классификацию, что и в задаче об атоме водорода в магнитном поле⁵⁻⁶ или в задаче о доноре в полупроводнике в отсутствие поля^{1,7}.

2. Для расчета мы пользуемся вариационным методом. Стандартным образом^{2,6} записывается безразмерное уравнение Шредингера (параметр анизотропии для кремния $m_{\perp}/m_x = 0,208$), однако иное выражение имеют используемые нами пробные волновые функции. Рецепт выбора в соответствии с идеологией работы⁶ приводит к следующему их виду:

$$\Psi_i = R_i(\rho, z, \varphi) \exp[-\Phi_i(\rho, z, \varphi)]; \quad i = 1s, 2s, 2p_{\pm 1}, 2p_0, 3p_0, 3d_{-1}, 3d_{-2}. \quad (1)$$

$$R_{1s} = 1, \quad R_{2s} = Q_{2s}, \quad R_{2p_{\pm 1}} = \rho e^{\pm i\varphi}, \quad R_{2p_0} = z, \quad R_{3p_0} = zQ_{3p_0}, \quad R_{3d_{-1}} = z\rho e^{-i\varphi},$$

$$R_{3d-2} = \rho^2 e^{-2i\varphi}, \quad Q_1 = 1 - c_i \sqrt{m_i^2 + \sqrt{z^2 + d_i^2 \rho^2 + s_i^2 (\rho^2 + t_i^2 z^2)}}$$

$$\Phi_i = \sqrt{a_i^2 (\rho^2 + b_i^2 z^2) + \sqrt{1 + H^2 (u_i \rho^2 + w_i z^2)} \sqrt{z^2 + v_i^2 \rho^2 + \frac{H^2}{16} \rho^4}},$$

a_i, b_i, \dots - варьируемые параметры, H - безразмерное магнитное поле. Единичным безразмерным величинам соответствуют реальные значения:

$$\frac{m_{\perp} e^4}{2 \hbar^2 e^2} \cong 18,9 \text{ мЭВ}, \quad \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_{\perp} e^2} \cong 32,6 \text{ А}^\circ, \quad \frac{e^3 m_{\perp}^2 c}{\hbar^3 e^2} \cong 620 \text{ кЭ}.$$

Функции Ψ_{1s} и Ψ_{2s} не ортогональны друг другу, также как Ψ_{2p_0} и Ψ_{3p_0} . Методом Галеркина отыскивается оптимальный двумерный ортогональный базис для такой пары состояний. Различные косвенные и прямые проверки показывают, что функции (1) с параметрами, найденными в результате решения спектральной задачи, могут быть использованы для расчета матричных элементов мультипольных моментов.

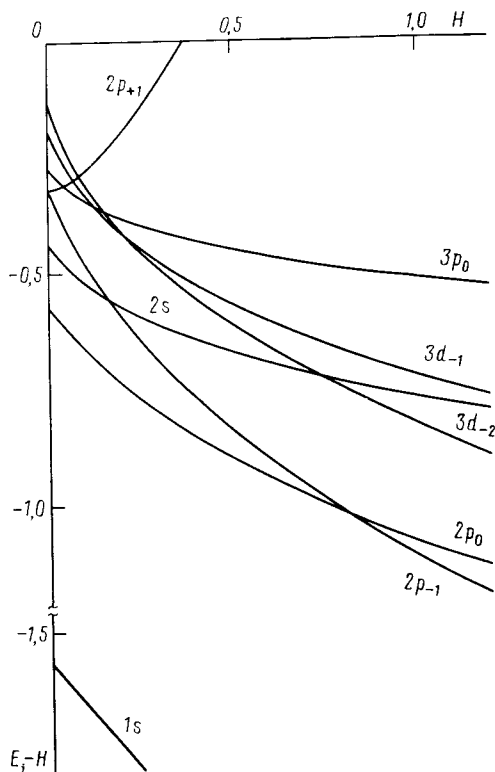


Рис. 1.

3. Графически результат расчета энергии ионизации представлен на рис.1. Пересечения уровней приведены в таблице (первое число H , второе $H - E_i$ в безразмерных единицах). Значение энергии связи в нулевом поле указано рядом со спектральным индексом. Пересечения, возникающие из-за анизотропии эффективной массы отмечены (*).

1s; 1,567	2p ₊₁ ; 0,321	2s; 0,444	3p ₀ ; 0,275	2p ₀ ; 0,576	3d ₋₁
3d ₋₂ ; 0,132	0,085; 0,293	0,74;* 0,726	0,15;* 0,366	4,73; 1,651	0,21;* 0,422
2p ₋₁ ; 0,321		0,16;* 0,557		0,82;* 0,204	
3d ₋₁ ; 0,194	0,071; 0,301	1,59; 0,851	0,12;* 0,353		
3p ₀ ; 0,275	0,045; 0,312				

Рассмотрим пересечение (2s, 2p₋₁). В слабом электрическом поле, направленном перпендикулярно \vec{H} , находим вблизи пересечения спектр.

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_{2s} + E_{2p_{-1}} \pm \sqrt{(E_{2s} - E_{2p_{-1}})^2 + V^2 \mathcal{E}^2}), \quad \mathcal{E} = 2e^3 \hbar^4 |\vec{E}| / m_{\perp}^2 e^5, \quad (2)$$

где $V(H) = \langle 2s | \rho e^{i\varphi} | 2p_{-1} \rangle$ и поляризацию

$$P_{\pm} = \pm \mathcal{E} V^2 / 2 \sqrt{(E_{2s} - E_{2p_{-1}})^2 + V^2 \mathcal{E}^2}.$$

Зависимость $V(H)$ показана на рис.2. Разумеется эти формулы справедливы, когда можно пренебречь квадратичным вкладом в спектр других близких к 2s- и 2p₋₁-состояний, например, необходимо

$$\mathcal{E} / V \ll |E_{2s} - E_{2p_{+1}}| / \langle 2s | \rho e^{-i\varphi} | 2p_{+1} \rangle^2.$$

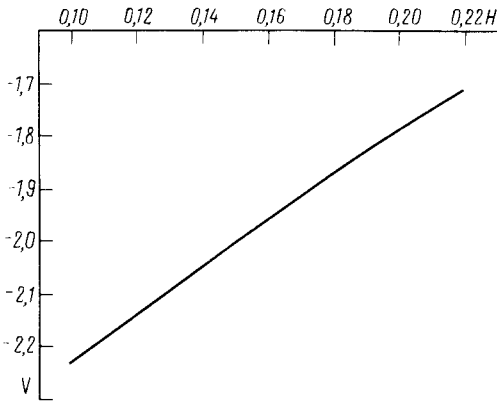


Рис. 2.

4. Предположим, что диодная структура на базе кремния с концентрацией мелких доноров N_d порядка $10^{16} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$ помещена в магнитное поле 99 кэ, направление которого совпадает с главной осью кристалла и лежит в плоскости $p-n$ -перехода. Электрическое поле в области $p-n$ -перехода, регулируемое приложенным внешним напряжением, может быть порядка $10^3 \div 10^4 \text{ в/см}$. Тогда расщепление уровня согласно (2) составляет милливольт или меньше. При температуре порядка 1°K можно создать различную заселенность f_{\pm} уровней E_{\pm} , используя, например, подсветку частотой $\omega = G - E_-$ (G - ширина запрещенной зоны). Емкость диода в результате изменится, как вследствие перераспределения зарядов, так и по причине изменения диэлектрической проницаемости. Заметим, не вдаваясь в детали возможного опыта, что этот последний эффект,

$$\Delta\epsilon/\epsilon \cong (f_+ - f_-) N_d (\hbar^2 \epsilon / m_{\perp} e^2)^3 4\pi V^2 / \sqrt{(E_{2s} - E_{2p_{-1}})^2 + V^2 \mathcal{E}^2}$$

может быть вполне зафиксирован емкостными измерениями. Его величина при соответствующих условиях достигает десятков процентов.

Благодарим Г.Н.Гольцмана, А.И.Елантьева, И.Б.Левинсона и А.В.Турбинера за полезные обсуждения.

Литература

1. Kohn W., Luttinger J.M. *Phys. Rev.*, 1955, 98, 915.
 2. Lee N., Larsen D.M., Lax V. *J. Phys. Chem. Solids*, 1973, 34, 1817; 1974, 35, 401.
 3. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, 1972, "Наука".
 4. Гершензон Е.М., Гольцман Г.Н., Елантьев А.И. *ЖЭТФ*, 1977, 72, 1063.
 5. Турбинер А.В. *УФН*, 1984, 35, 144.
 6. Турбинер А.В. *ЯФ*, 1987, 46, 204.
 7. Бейнихес И.Л., Коган Ш.М. *ЖЭТФ*, 1987, 93, 185.
-